

補助事業番号 2020M-147

補助事業名 2020年度 コンビナトリアル化学反応のためのナノマイクロシステム創製

補助事業者名 兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所 ナノマイクロシステムグループ

山口明啓

1 研究の概要

化学合成や化学品生産には、多くの場合、熱エネルギーを用いた反応プロセスが利用されている。熱エネルギーはもっとも身近にあり、利用が用意であるが、昨今の地球温暖化問題に関する課題解決に向けて、もっと高効率の反応プロセスの研究開発が要望されている。本研究開発では、いくつかの新しい反応過程の創製とシステム化を行うことで、コンビナトリアル化学反応系を構築することを目的として研究開発を行う。本年度は、特にマイクロ波化学合成系を中心にして、マイクロ波化学反応を手のひらサイズの大きさで、マイクロ流路と組み合わせ、化学反応過程を可視化するシステムの創製を行った。ポスト壁構造を用いることで、マイクロ流路と組み合わせたマイクロ流路システムを構築して、透明導電膜を導入することで、反応過程の可視化にも成功した。コンビナトリアル化学システムの一つの反応システムの基本構造を構築することができ、基礎研究にも応用研究にも展開できることを示した。

2 研究の目的と背景

2030年開業を目指して、超伝導リニアの建設が進んでいる。営業速度 500 km/h の速度を実現し、名古屋—東京間を 40 分で接続するという夢の超特急は科学技術の粋を結集した大事業である。トンネル内の空気を減圧することによって、時速 2000 km/h も可能であり、世界中を超伝導リニアで接続する夢のような話も可能かもしれない。超伝導リニアを支えているのは、BCS 超伝導理論の壁を突破した高温超伝導体の発見と世界に類を見ない材料開発による地道な歩みである。持続可能な社会とは、科学技術の発展と進歩を伴うイノベーションを連続的に起こすことで、人々に夢を与え、働く喜びを享受する社会である。その社会の根幹となるのは、新材料の探索であり、それらを実用化するための生産プロセスの構築と開発および反応技術である。材料探索では、今では AI によるデータベースを中心にした深層学習などで過去の文献からの情報を抽出して、目的にあった新しい物質合成などが行える状況になっているが、約 100 種類ほどある元素の組み合わせで合成できる材料は、ほとんど無限種類あるといっても過言ではない。つまり、材料探索は、まだまだ無限にできるということである。しかし、これを人の手で合成して物性評価していると非常に非効率である。そこで、微量合成して自動的に評価するような仕組みがあると、AI と組わせて、自動的に材料探索を行うことができる。新しい超伝導材料からコロナ禍に対応できる治療薬まで、多岐にわたる材料を合成して、データベース化していければ、欲しい特性に合わせて、その場で合成するシステムも夢ではない。

本研究開発では、系統的かつコンビナトリアルに単位化学操作を実現できるナノ・マイクロシステムを創製することを目標として、熱エネルギーを直接利用した化学反応系に

置き換わる反応系の基本構造構築とシステム創製を行う。対象とした反応系は、[1]光化学反応と[2]ミリ波・マイクロ波化学反応励起である。特に、この研究開発では、[2]のマイクロ波化学反応系を小型・可視化を行うことを目的として研究を実施した。

3 研究内容

「コンビナトリアル化学反応のためのナノマイクロシステム創製に関する研究」

近年、マイクロ波を熱源とするマイクロ波化学合成に関する研究開発が進んでいる。マイクロ波加熱の特徴である高い反応収率、選択性、反応速度は、有機・無機化学や高分子化学、金属錯体化学などの分野で実証・応用されており、マイクロ波加熱合成は革新的な化学合成方法として認められている。現在、マイクロ波化学装置の基本構造は、2.45 GHz帯域を中心として、最大数kW程度の高出力マイクロ波発生源から構成されている。長方形の導波路を組み合わせて、マルチモード空洞共振器として利用する例がほとんどで、大量生産やバッチ処理としての利用を主体としている。このような反応系では、金属筐体のマイクロ波空洞共振器を用いるため、内部での反応をリアルタイムでモニタリングすることが困難であり、多種多様な化学合成を行って物質探索するような利用には適さない。そこで、本研究開発では、微量で多品種を網羅的に合成しつつ、反応過程をモニタリングするようなシステムを構築することを目的として、マイクロ流体システムにポスト壁導波路を実装した仕組みをコンビナトリアル化学合成系として構築する。

ここで、システムを小型化し、反応効率を向上させるために、24.125GHz帯域のマイクロ波を想定したポスト壁導波路構造とマイクロ流体チャンネルを設計して製作した。図1に、作製したポスト壁導波路とマイクロ流体チャンネルを搭載したシステムの模式図と実物写真を示す。

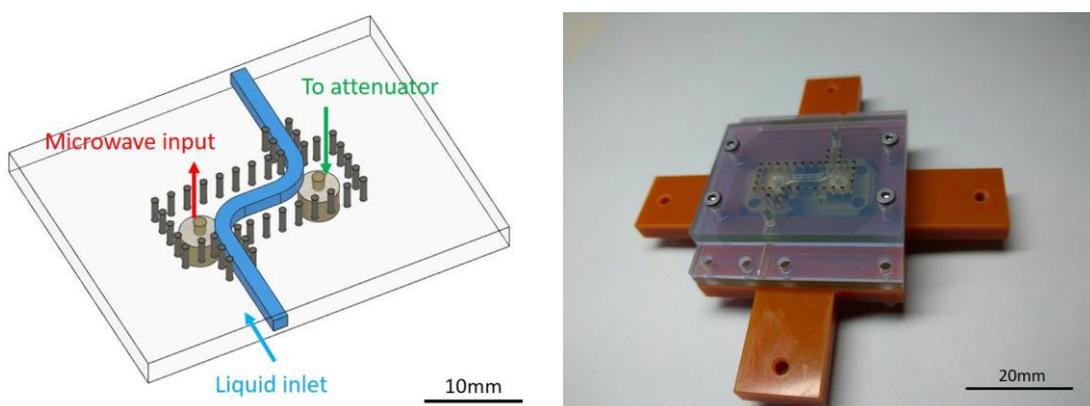


図1 マイクロ波化学合成システムの(a)鳥瞰図と(b)実際に作製したシステムの写真.

酸・アルカリに耐性を有し、反応過程を可視化するために、構造材料としてフッ素系樹

脂FEPとITOスパッタガラス基板の組み合わせを用いた。構築したシステムの基本特性を評価し、コンピュータ・シミュレーションで再現した。この結果を基にして、構築したシステムを用いて、金属錯体（ルテニウム錯体）の合成実験を行った結果と反応生成前後の吸収スペクトル測定結果を図2に示す。反応が進行すると、吸収スペクトルが大きく変化し、反応が進行するに伴い波長の短い光が吸収されて、波長の長い蛍光発光が起きる。結果として、図2に示すように、流路に赤紫色の発光が生じる。これは、マイクロ波照射によって、化学反応が進行して、ルテニウム錯体が合成されていることを示しており、マイクロ波化学合成反応をマイクロ流体システムで可視化した例は初めてである。

以上のように、目的とした化学合成システムを構築することができた。今後は、この基本システムを組み合わせ、流路に導入する試薬を複数にすることで、コンビナトリアル化学合成システムの構築ができると考えられる。また、これらの反応系について電気化学測定と組み合わせるシステムについての構築も検討しており、反応促進と反応過程モニタリングとフィードバック制御を統合したシステムの創製を引き続き行っていきたいと考えている

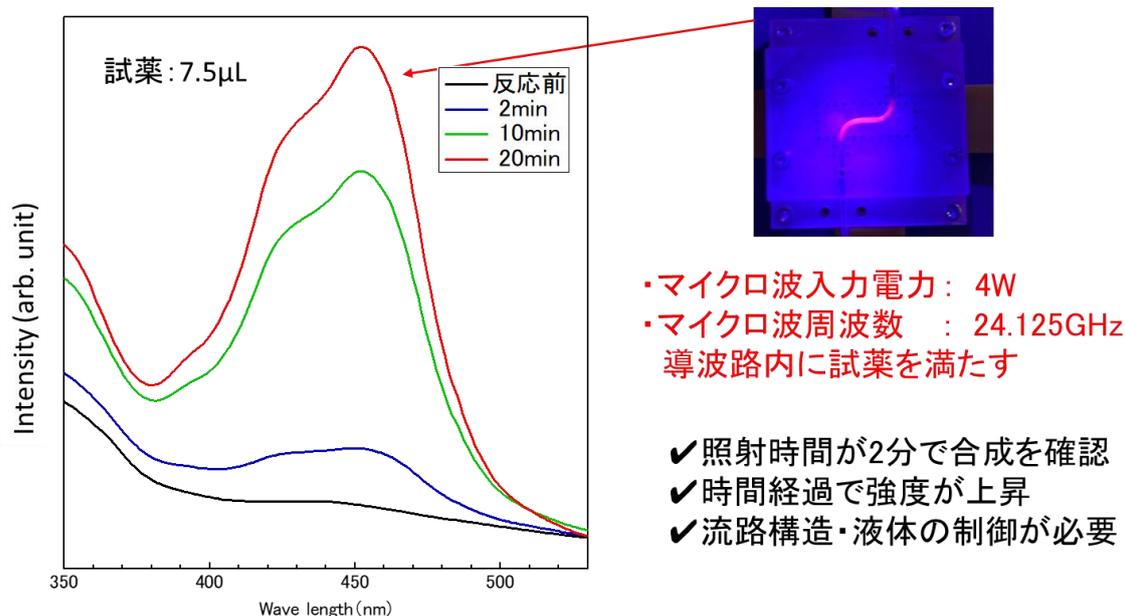


図2 本研究開発事業で構築したマイクロ波化学合成システムを用いて、ルテニウム錯体を合成した前後の吸収スペクトル測定結果。写真は、マイクロ波照射20分後のマイクロ流路内の観察像である。

4 本研究が実社会にどう活かされるか—展望

コロナ禍が発生し、世界中がパンデミックに遭遇した。このような事態では、ワクチンも重要であるが、治療薬の創製と供給も非常に重要である。創薬では、様々な物質を合成して、その物質を生物で毒性や効能などを調べる必要がある。約100種類ある元素から、その組み合わせによって無限の物質が合成できる可能性があり、どれが治療薬に有効なのか調べるのは非常に時間と労力がかかる。本システムがあれば、元素を自在に組み合わせ、試薬を微量で多品種自動合成して、分析も自動化することが可能である。このような仕組みがあれば、AIと組み合わせて、様々な物質合成を行い、その物性評価と生物学的特性を調べながら、データベースを構築しながら、新しい物質探索が可能となる。本システムをさらに発展させることで、このような完全自動化したコンビナトリアル化学反応システムが創製できれば、治療薬の開発や新しい機能性材料の創製が飛躍的に向上することが期待される。

5 教歴・研究歴の流れにおける今回研究の位置づけ

申請者らは、ナノマイクロシステムやマイクロ流体システムの創製と基礎・応用研究への展開を主軸にして研究開発を行ってきた。今回の研究開発は、まさにこれまでの研究の流れの本流の一つであり、形としてシステムが創製でき、その実証実験がなされた結果である。今後の研究開発にとっても、基本構造の一つが形成できたことは非常に大きな意味を持っており、今後の研究開発をさらに促進して、大きく展開する起点となることが期待される。

6 本研究にかかわる知財・発表論文等

- [1] K. Fujitani, M. Kishihara, T. Nakano, R. Tanaka, A. Yamaguchi, and Y. Utsumi, “Development of Microfluidic Device Coupled with Post-wall Waveguide for Microwave Heating at 24.125GHz”, *Sensors and Materials*, in printing

7 補助事業に係る成果物

(1) 補助事業により作成したもの

- [1] K. Fujitani, M. Kishihara, T. Nakano, R. Tanaka, A. Yamaguchi, and Y. Utsumi, “Development of Microfluidic Device Coupled with Post-wall Waveguide for Microwave Heating at 24.125GHz”, *Sensors and Materials*, in printing

(2) (1)以外で当事業において作成したもの

8 事業内容についての問い合わせ先

所属機関名： 兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所
(ヒョウゴケンリツダイガク コウドサンギョウカガクギジュツケンキュウシヨ)

住 所: 〒678-1205
兵庫県赤穂郡上郡町光都3-1-2

担 当 者: 准教授 山口明啓 (ヤマグチ アキノブ)
教授 内海 裕一 (ウツミ ユウイチ)

担 当 部 署: ナノマイクロシステム分野(ナノマイクロシステム ブンヤ)

E - m a i l: yamaguti@lasti.u-hyogo.ac.jp
utsumi@lasti.u-hyogo.ac.jp

U R L:

<https://www.lasti.u-hyogo.ac.jp/microsystem/utsumi-group/utsumi-groupindex.html>